



TITLE:

溶媒依存性らせん反転を示すポリ (キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解 明

AUTHOR(S):

長田, 裕也

CITATION:

長田, 裕也. 溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 54-54

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241181>

RIGHT:

溶媒依存性らせん反転を示すポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の構造解明

Elucidation of the Structures of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s

Exhibiting Solvent-dependent Helix Inversion

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 長田裕也

研究成果概要

主鎖にらせん構造を有する合成高分子は、不斉触媒や不斉光学材料への応用が期待され近年大きな注目を集めている。特に、主鎖にらせん不斉を外部刺激によって反転させることのできる合成高分子は、キラリティスイッチング型材料の基本骨格として大きな注目が集まっているものの、不斉らせん構造反転のメカニズムについての知見は極めて限られていた。

我々のこれまでの研究において、光学活性側鎖に有するらせん高分子ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル) (以下 PQX と略する) について、分子動力学計算による分子モデル構築を行った。計算には BIOVIA Materials Studio を用い、分子力場として COMPASS II を用いた。得られた分子モデルに基づいた小角中性子散乱パターンのシミュレーションと比較することで、右巻き／左巻き構造を持つ PQX の構造の推定したところ、溶液中で PQX が周囲との相互作用を持たないときには側鎖がコンパクトに縮まり左巻き構造をとり、適切な溶媒を用いることで側鎖が外側に引き出された場合には右巻き構造をとることが明らかとなった。¹

本年度の研究では、溶媒依存性らせん反転を示す PQX の構造とそのダイナミクスを明らかにすることを目的とし、BIOVIA Materials Studio を用いた分子動力学シミュレーションを行った。現在、得られたトラジェクトリについて溶液中での中性子準弾性散乱測定の結果と比較を行うことで、溶液中での PQX 側鎖のダイナミクスについて検討を進めている。また、高分子主鎖の不斉らせん構造の量子化学計算に関する知見を活かし、面不斉光学活性化合物の不斉光学特性についても検討し論文報告を行った。²

発表論文(謝辞あり)

- (1) Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Suginome, M.; Sato, S.; Sugiyama, M.; Porcar, L.; Martel, A.; Inoue, R.; Sato, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 2722-2726.
- (2) Kikuchi, K.; Nakamura, J.; Nagata, Y.; Tsuchida, H.; Kakuta, T.; Ogoshi, T.; Morisaki, Y. *Chem. Asian J.* **2019** (in press).

発表論文(謝辞なし)

- (3) Shimizu, Y.; Shoji, Y.; Hashizume, D.; Nagata, Y.; Fukushima, T. *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 12314-12317.
- (4) Nagata, Y.; Shimada, Y.; Nishikawa, T.; Takeda, R.; Uno, M.; Ogoshi, T.; Suginome, M. *Synlett* **2018**, *29*, 2167-2170.
- (5) Nagata, Y.; Nishikawa, T.; Terao, K.; Hasegawa, H.; Suginome, M. *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* **2019**, *57*, 260-263.